Lagrange解析について(複素WKB法の理論と物理学への応用)

山田, 春樹

数理解析研究所講究録
788巻 1992年 45-58

Lagrange 解析について

宮城教育大・教育　山田春樹 (Haruki YAMADA)

1° はじめに

多変数の実WKB法における大域的「近似解」の構成に際して現れる困難はMaslovの方法により除かれた。しかし，Maslovの意味の「近似解」が本当に，真の解の漸近近似解になっているか否かは不明である。また量子力学の固有値問題を扱う際に用いられる論法「ℏを0に近づくparameterとみて漸近的な計算を行い，然るのちにℏとして有限な値を代入して量子化条件を導く」ことは数学的に問題がある。

Lerayは Maslov の考えを整理，発展させ，「漸近近似」とは異なるわく組みの中で「新しい問題」を取り扱うことを提案した。このわく組みが Lagrange 解析である。この立場に立つと，Planck定数が理論の中で，無限小parameterとしてでなく，ある有限定数(data)として導入できる。

一様な磁場の中での水素原子の電子の運動を記述する Schrödinger 方程式の固有値問題については，変数分離法と

特殊関数の性質を用いて量子数が導入され，離散的なenergyの値が具体的に計算できている．一方，この問題に対応する「Lagrange解析における問題」を考えると，全く同じ量子化条件が得られる．

以下では，Lagrange解析の簡単な説明ののちに，具体的な計算を通してLagrange解析の立場からの量子化条件の導出の過程を説明する．

2° 多変数実WKB法．

これは普通

$$a(x, \frac{1}{\nu}\frac{\partial}{\partial x})u = 0 \qquad \nu \in i[0,\infty) \quad , \; x \in \mathbb{R}^l$$

の $\nu \to i\infty$ での「近似解」

$$u(x,\nu) = \left(\sum_0^\infty \frac{\alpha_r(x)}{\nu^r}\right) e^{\nu\phi(x)}$$

を次のような仕方で求める手続きのことを云う．

(1) $\phi(x)$は，作用素 a を与える Hamiltonian $H(x,p)$ に対して，$H(x, \nabla\phi(x)) = 0$ をみたすように選ぶ．

(2) $\alpha_r(x)$ $(r=0,1,2,\cdots)$ は相空間において $H(x,p)$ のきめる Hamilton 流にそって，ある種の線型一階常微分方程式を解く（即ち積分する）ことにより逐次求める．

(1)は局所的には相空間内の l 次元多様体Vで，その上で

$$d\langle p, dx\rangle = dp\wedge dx \;\left(=\sum dp_j\wedge dx_j\right) = 0$$

となるものをみつけるという問題と同値であり，このように云い換えた問題は相空間内で大域的に設定できる．一般に相空間（$2l$ 次元）内で l 次元多様体 V が，

$$dp \wedge dx = 0 \quad \text{on } V$$

をみたすとき，V を Lagrange 多様体とよぶ．したがって，WKB「近似解」を構成するにはまず，超曲面 $H(x,p)=0$ 内の Lagrange 多様体 V を見つけなくてはならない．ところが大域的に定まる V は必ずしも x-変数の関数の graph として

$$V : p = p(x)$$

の形に表せるわけではない．このように V 上の点で，x 変数の関数の graph として表せないような点を V の caustic とよび Σ_V で表すことにする．すると，$\phi(x)$，$\alpha_I(x)$ は Σ_V 上特異性をもち，したがって上述の WKB 法は Σ_V 上では破綻してしまう．（なお，量子力学の固有値問題を扱う際には，作用素 a の中に energy parameter E を含めて扱う．したがって問題は $au=Eu$ ではなく $au=0$ とかける）．

3°. Maslov の方法

Maslov [2] は，$\phi(x)$，$\alpha_I(x)$ の特異性が，それらを Lagrange 多様体 V（の普遍被覆空間 $\check{V}$）上の関数として扱う限りは解消されることに着目し，parameter を含む Fourier 変換を用

いることにより大域的に（即ち Σ_ν を越えて）「近似解」を構成する方法を見出した．その手続きの概略は次の通りである（cf. [3]）なお，作用素の自己共役性，関数の C^∞－依存性など細かい状況設定は省略する．

(1) parameter $\alpha=(\alpha_1,\cdots,\alpha_k)$ に依存する compact で境界のない Lagrange 多様体の族 $\{V(\alpha)\}$ を考える．（各 $V(\alpha)$ は torus になることが知られている）．各 $V(\alpha)$ は $H(x,p)=0$ に含まれ，かつ α が変わることにより $V(\alpha)$ は全体としてこの超曲面をうめつくすとする．

このとき $V(\alpha)$ の普遍被覆空間 $\check{V}(\alpha)$ 上の関数から，$\mathbb{R}^\ell$ 上の関数への正準作用素とよばれる作用素 $K_{\check{V}(\alpha)}$ が定義できるが，これが $V(\alpha)$ 上の関数に作用する作用素とみることができるための条件は，

(2)（Maslov の量子化条件）

$$\frac{\nu}{2\pi i}\int_{\gamma(\alpha)}\langle p,dx\rangle-\frac{1}{4}m(\gamma(\alpha))\in\mathbb{Z}\qquad \text{for } \forall\gamma(\alpha)\in\pi_1[V(\alpha)]$$

但し $m(\gamma(\alpha))\equiv(\gamma(\alpha)$ と $\Sigma_{V(\alpha)}$ の交叉数）（$\Sigma_{V(\alpha)}$ は然るべき仕方で向きづけられている）．

この条件は（$V(\alpha)$ が ℓ 次元 torus になることから）ℓ 個の量が整数になるという条件であり，parameter α に関する離散的な条件になっている．α を (2) をみたすようにとると，

正準作用素 $K_{V(\alpha)} : C^{\infty}(V(\alpha)) \longrightarrow C^{\infty}(\mathbb{R}^{\ell})$ が定義でき，
これを用いて，

$$u(x) \equiv K_{V(\alpha)} \cdot 1 \qquad (1 \text{ は } V(\alpha) \text{ 上の定数関数})$$

とおくと

$$a(x, \frac{1}{\nu}\frac{\partial}{\partial x})\, u = 0 \quad (\bmod \frac{1}{\nu^2})$$

がなりたつ．この意味で u は $au=0$ の「近似解」である．
しかしこの u が，実際に真の解の近似解であるか否かは，証明されていない（cf.［3］）．また量子化条件を出す際には，有限値 $\nu = \nu_0 = \frac{1}{\hbar}$ を入れて離散的な α を決めるという手続きを行っている．

4° Leray の方法．

Leray［1］は Maslov の方法を「漸近理論」から独立させて新しい構造の中でとらえ直した．これが彼が Lagrange 解析と呼ぶものであり，それは次の様な構成要素よりなっている：

(1) symplectic vector 空間 Z（相空間に相当する）．

(2) Lagrange 多様体 $V \subset Z$ の普遍被覆空間 $\check{V}$ 上の Lagrange 関数 $\check{U}$.

これは次のように定義する： Z に symplectic な (x, p) 座標系（位置-運動量座標系）R を指定すると，そのもとでの V の見かけの特異点（caustics）の集合 Σ_R がきまる．各

frame Rを指定する毎に，そのもとで次の形の「形式的関数」が与えられているとする：

$$\check{\mathfrak{U}}_R(\nu,\check{x})=\Big(\sum_0^{\infty}\frac{a_r(\check{x})}{\nu^r}\Big)\,e^{\nu\phi_R(\check{x})}\qquad \text{on } \check{V}\setminus\check{\Sigma}_R$$

ここで $\phi_R(\check{x})$ は $\nabla\phi_R$ の graph が Vを与えるような関数である．さらに任意の2つの frame R,R' に対する $\check{\mathfrak{U}}_R$，$\check{\mathfrak{U}}_{R'}$ が $\check{V}\setminus\check{\Sigma}_R\cup\check{\Sigma}_{R'}$ 上で $S=RR'^{-1}\in Sp_2(\ell)$ に対応するある積分変換による変換則

$$S\check{\mathfrak{U}}_{R'}=\check{\mathfrak{U}}_R$$

をみたしているとする．このとき $\check{\mathfrak{U}}\equiv\{\check{\mathfrak{U}}_R\}$ を $\check{V}$上の Lagrange関数とよぶ（「関数」といっても νをparameterにもつ形式的関数である）．

(3) Lagrange作用素 a.

これは次のように定義する：Z上の形式的関数

$$H(\nu,z)=\sum_0^{\infty}\frac{a_r^{\circ}(z)}{\nu^r}$$

が与えられたとき，frame Rをきめると Hは(x,p)-表示で

$$H(\nu,z)=H_R^{\circ}(\nu,x,p)$$

と書ける。このとき

$$a_R^{+}(\nu,x,p)\equiv e^{\frac{1}{2\nu}\langle\frac{\partial}{\partial x},\frac{\partial}{\partial p}\rangle}H_R^{\circ}(\nu,x,p)$$

として

$$a_R^{+}(\nu,\overset{②}{x},\overset{①}{\tfrac{1}{\nu}\tfrac{\partial}{\partial x}})$$

という形の作用素を与える．すると

$$\check{\mathfrak{U}}_R\longmapsto a_R^{+}\check{\mathfrak{U}}_R$$

によって $\check{V}$ 上の Lagrange 関数 $\check{U}=\{\check{U}_R\}$ を $\check{V}$ 上の Lagrange 関数 $a\check{U}=\{a_R^+\check{U}_R\}$ にうつす作用素がきまる。これを Lagrange 作用素とよぶ。

(4) Lagrange 多様体 V 上の Lagrange 関数 U.

$\check{V}$ 上の Lagrange 関数 $\check{U}$ の $\gamma\in\pi_1[V]$ のもとでの作用 $\check{U}\mapsto\gamma\check{U}$ を定義する際に，任意定数 ν_0 が導入される。このとき，

$$\gamma\check{U}=\check{U}\qquad\text{for}\quad\forall\gamma\in\pi_1[V]$$

をみたすことで V 上の Lagrange 関数 U が定義される。（したがって，ある $\check{U}$ が V 上の Lagrange 関数 U であるか否かは，ν_0 の指定の仕方に依る。量子力学の問題では $\nu_0=\frac{i}{\hbar}$ ととることになる）。

Lagrange 解析においては，普通の解析学で「関数」と「(擬)微分作用素」の果す役割を「Lagrange 関数」と「Lagrange 作用素」が果し，そのもとでいろいろな問題が設定される。

このわく組みの中で，たとえば次のような定理が成り立つ。

<u>定理</u>(Leray). Z : $2l$ 次元 symplectic vector 空間

$a^{(1)},\cdots,a^{(l)}$: $H^{(1)},\cdots,H^{(l)}$ に対応してきまる Lagrange 作用素

とし，$\{H^{(i)},H^{(j)}\}=0$ for $\forall i,j$ (Poisson bracket が 0) とする。

このとき

$$a^{(j)} \mathcal{U} = 0 \pmod{\tfrac{1}{\nu^2}}\ ;\ j=1,2,\cdots,l$$

をみたす V 上の Lagrange 関数 $\mathcal{U} \pmod{\frac{1}{\nu}}$ が唯一つ存在するために V のみたすべき必要充分条件は,

(i) V は $H^{(1)}=0,\cdots,H^{(l)}=0$ の連結成分であり,

(ii) V は Maslov の量子化条件

$$\frac{\nu_0}{2\pi i}\int_\gamma \langle p, dx\rangle - \frac{1}{4}m(\gamma) \in \mathbb{Z} \qquad \text{for } \forall\gamma \in \pi_1[V]$$

をみたす.

($m(\gamma)$ の計算には frame R のもとでの Σ_R を必要とするが, これは R のとり方に依らない)

次にこの定理を具体的問題に適用した計算例を示す.

5° 具体例への適用.

電場 ϕ (scalar potential), 磁場 $A=(A_1, A_2, A_3)$ (vector potential) のもとでの電子の運動を記述する Hamiltonian は,

$$H = \frac{1}{2\mu}\sum_1^3\left(p_j - \frac{e}{c}A_j(x)\right)^2 - E - e\phi(x),$$

対応する Schrödinger 作用素は

$$a = \frac{1}{2\mu}\left\{\frac{1}{\nu^2}\Delta + \frac{2e}{c}\sum_1^3 A_j(x)\frac{1}{\nu}\frac{\partial}{\partial x_j} + \frac{e^2}{c^2}\sum A_j(x)^2\right\} - E - e\phi(x)$$

である. とくに電場として原点に集中した電荷 e よりなるもの

$$\phi(x) = \frac{e}{R} \qquad (\; R = |x| \;)$$

磁場として x_3-軸方向の一様な磁場

$$\mathbb{A} = \left(-\tfrac{1}{2}\mathcal{H}x_2, \; \tfrac{1}{2}\mathcal{H}x_1, \; 0\right)$$

を考え，$\mathcal{H}$ を小として $\mathcal{H}^2$ の項を無視すると，

$$H = \frac{1}{2\mu}\left[P^2 + \frac{e}{c}\mathcal{H}M - 2\mu E - \frac{2\mu e^2}{R}\right]$$

$$\mathfrak{a} = \frac{1}{2\mu}\left\{\frac{1}{\nu^2}\Delta + \frac{e\mathcal{H}}{c\nu}\left(x_1\frac{\partial}{\partial x_2} - x_2\frac{\partial}{\partial x_1}\right) - 2\mu E - \frac{2\mu e^2}{R}\right\}$$

となる．但し，

$$R = |x|, \quad P = |p|, \quad L = |x \wedge p|, \quad Q = \langle x, p\rangle$$

$$M = x_1 p_2 - x_2 p_1$$

とした．M は $x \wedge p$ の第3成分だから $|M| \leqslant L$．　また

$$P^2 R^2 = L^2 + Q^2$$

である．そこで上の形の H, $\mathfrak{a}$ を含む次のような H と，対応する $\mathfrak{a}$ について考える：

$$
\begin{aligned}
H(x,p) &= H[L, M, Q, R] \\
&\equiv \frac{1}{2}\left[P^2 + A(M) - \frac{2B(M)}{R} + \frac{C(M)}{R^2}\right] \\
(*) \qquad &= \frac{1}{2R^2}\left[L^2 + Q^2 + A(M)R^2 - 2B(M)R + C(M)\right]
\end{aligned}
$$

$(A(M), B(M), C(M)$ は M の1次関数$)$．

このとき簡単な計算で

$$\{H, L^2\} = \{L^2, M\} = \{M, H\} = 0$$

であることがわかる. したがって H, L^2, M に対応する作用素 a, a_{L^2}, a_M に対して次のような Lagrange 解析の問題を設定し, それに先の定理を適用することができる.

問題: $a\mathcal{U} = (a_{L^2} - L_0^2)\mathcal{U} = (a_M - M_0)\mathcal{U} = 0 \pmod{\frac{1}{\nu^2}}$ が唯一つの解 $\mathcal{U} \pmod{\frac{1}{\nu}}$ をもつような, compact Lagrange 多様体が存在するための条件を求めよ. (a は Energy parameter E を含んでいる).

定理によれば, そのための条件は,

(i) V は $H=0,\ L^2 = L_0^2,\ M = M_0$ の compact な連結成分.

(ii) V は Maslov の量子化条件をみたす.

(*) に対して (i), (ii) を具体的に計算することを考える.

$L = |x \wedge p| \neq 0$ であるところで

$$j_1 = \frac{x}{|x|},\quad j_3 = \frac{x\wedge p}{|x\wedge p|},\quad j_2 = j_3 \wedge j_1$$

によって動く直交座標系をとり, これからきまる Euler 角を

$$(\Theta, \Phi, \Psi) \quad (\mathrm{mod}\,\pi,\ \mathrm{mod}\,2\pi,\ \mathrm{mod}\,2\pi)$$

とする. このとき微分形式の計算によって,

$$\left[\begin{aligned} &\langle p, dx\rangle = \frac{Q}{R}dR + M\,d\Phi + L\,d\Psi \\ &d^3x \wedge d^3p = dL\wedge dM \wedge dQ \wedge \frac{dR}{R} \wedge d\Phi \wedge d\Psi \end{aligned}\right.$$

が得られる. とくにこれから, $|M| \leq L$ なるところでは, $Z \simeq \mathbb{R}^6$ における座標として, L, M, Q, R, Φ, Ψ を採用する

ことができる.(上の第1式は $\langle p, dx \rangle$ の作用-角変数による表示になっている). このとき,

$$V[L_0, M_0] : \ H = 0, \ L = L_0, \ M = M_0$$

は,

$$(\Phi \bmod 2\pi) \times (\Theta \bmod 2\pi) \times \Gamma[L_0, M_0]$$

$$(\Gamma[L_0, M_0] \text{ は } H[L_0, M_0, Q, R] = 0 \text{ の } R > 0 \text{ での連結成分})$$

で表される. $\Gamma[L_0, M_0]$ が $R > 0$ での閉曲線になるとき, $V[L_0, M_0]$ は3次元 torus になる.(以下これを要請する).

これで (i) の手続きは終った. そこで (ii) について考える.

$\pi_1[V[L_0, M_0]]$ の生成元は

$$\gamma_1 : 0 \leqslant \Phi \leqslant 2\pi, \quad \Theta, R, Q : \text{fixed}.$$

$$\gamma_2 : 0 \leqslant \Theta \leqslant 2\pi, \quad \Phi, R, Q : \text{fixed}.$$

$$\gamma_3 : (Q, R) \in \Gamma[L_0, M_0], \quad \Phi, \Theta : \text{fixed}.$$

他方, 再び微分形式の計算により.(d^3x の表現式を考えて)

$V[L_0, M_0]$ の frame $R(x, p)$ のもとでの見かけの特異点の集合 $\Sigma_{V[L_0, M_0]}$ は,

$$\Sigma_1 \cup \Sigma_2 \quad : \Sigma_1 : \ \Phi = 0 \bmod \pi$$

$$\Sigma_2 : \ H_Q[L_0, M_0, Q, R] = 0$$

で与えられる

ということがわかる.

$$\varphi_R = \int \langle p, dx \rangle = \int \frac{Q}{R} dR + M d\Phi + L d\Psi$$

に注意すれば，Maslovの量子化条件は，$\nu_0 = \frac{i}{\hbar}$ として，次のようにかける.（$m(\gamma_j)$ の符号を決めるとき，γ_j の向きと，$\Sigma_{V[L_0,M_0]}$ の向きに注意する必要があるが）.

$$\frac{\nu_0}{2\pi i}\int_{\gamma_1} \langle p, dx \rangle - \frac{1}{4} m(\gamma_1) = \frac{\nu_0}{2\pi i} 2\pi L_0 - \frac{1}{4}\cdot 2 = \frac{L_0}{\hbar} - \frac{1}{2}$$

$$\frac{\nu_0}{2\pi i}\int_{\gamma_2} \langle p, dx \rangle - \frac{1}{4} m(\gamma_2) = \frac{\nu_0}{2\pi i} 2\pi M_0 - \frac{1}{4}\cdot 0 = \frac{M_0}{\hbar}$$

$$\frac{\nu_0}{2\pi i}\int_{\gamma_3} \langle p, dx \rangle - \frac{1}{4} m(\gamma_3) = \frac{\nu_0}{2\pi i}\oint_{\Gamma[L_0,M_0]} \frac{Q}{R} dR - \frac{1}{4}\cdot(-2) = \frac{N_0}{\hbar} + \frac{1}{2}$$

が全て整数であること.（但し $N_0 \equiv \frac{1}{2\pi}\oint_{\Gamma[L_0 M_0]} \frac{Q}{R} dR$ とかいた）

これを，

$$\left[\begin{array}{l} \frac{L_0}{\hbar} - \frac{1}{2} = l, \quad \frac{M_0}{\hbar} = m, \quad \frac{N_0}{\hbar} + \frac{1}{2} = n - l \\ \qquad\qquad \text{for } \exists\, l, m, n \in \mathbb{Z} \end{array}\right.$$

と表現しておこう.（これがMaslovの量子化条件である）.

なお，$|M_0| < L_0$ より $|m| \leq l + \frac{1}{2}$. $N_0 > 0$ より，$l + \frac{1}{2} < n$ であり，したがって

$$|m| \leq l < n$$

である. 次に N_0 を具体的に計算する. compact な $V[L_0, M_0]$ が得られるのは，(*)より，

$$L_0^2 + Q^2 + A(M_0)R^2 - 2B(M_0)R + C(M_0) = 0$$

が RQ-平面上，$R > 0$ における楕円になるときであり，そ

のための条件は，（$A_0 = A(M_0)$ などとかくことにして），

$$A_0 > 0, \quad C_0 + L_0^2 > 0, \quad B_0 > \sqrt{A_0}\sqrt{L_0^2 + C_0} .$$

このときには具体的に積分計算ができて

$$N_0 = \frac{1}{2\pi}\oint_{\Gamma[L_0, M_0]} \frac{Q}{R} dR = \frac{B_0}{\sqrt{A_0}} - \sqrt{L_0^2 + C_0} > 0 .$$

したがって最終的にMaslovの量子化条件は，

$$\exists\, l, m, n \in \mathbb{Z}$$

$$\text{s.t.} \quad |m| \leq l < n$$

$$L_0 = \hbar(l + \tfrac{1}{2}), \quad M_0 = \hbar m$$

$$L_0 + \frac{B_0}{\sqrt{A_0}} - \sqrt{L_0^2 + C_0} = \hbar n$$

とくに，はじめにのべた作用素，

$$a = \frac{1}{2\mu}\left\{\frac{1}{\gamma^2}\Delta + \frac{e\mathcal{H}}{c\gamma}\left(x_1\frac{\partial}{\partial x_2} - x_2\frac{\partial}{\partial x_1}\right) - 2\mu E - \frac{2\mu e^2}{R}\right\}$$

にたいしては，

$$L_0 = \hbar(l + \tfrac{1}{2}), \quad M_0 = \hbar m$$

$$E = -\mu c^2 \frac{\alpha}{2n^2} + \beta\mathcal{H} m$$

$$\text{但し} \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c}, \quad \beta = \frac{e\hbar}{2\mu c}$$

となり，古典的な量子化条件と同じ結果が得られたことになる．

なお，Leray[1] ではさらに，定磁場内の一電子原子に対するDirac方程式に対応する Lagrange 解析の問題につい

ても論じられており，Bethe-Salpeter の結果との比較などがなされている．

6° おわりに．

いくつかの基本的問題を示しておく．

(1) 古典力学の種々の積分可能系について，Lagrange 問題と，L^2-固有値問題から導かれる量子化条件はどこまで一致するだろうか．またその理由は何か．

(2) Lagrange 解析的立場で tunnel 効果のある場合（二重井戸 potential など）を扱えるだろうか．

(3) Maslov-Leray の解は本当に真の解の近似解になっているのだろうか．

文献

[1] J. Leray : Lagrangian Analysis and Quantum Mechanics, MIT Press (1981)

[2] V.P. Maslov : 摂動論と漸近的方法，岩波書店 (1976)

[3] V.P. Maslov and M.V. Fedoriuk : Semiclassical Approximation in Quantum Mechanics, Reidel Publ. (1981)

(Original ed. は [1] 1976/77 , [2] 1965, [3] 1976)